

Si/SiO₂/LiNbO₃構造を伝搬する高圧電性境界波

Highly Piezoelectric Boundary Waves in Si/SiO₂/LiNbO₃ Structure

山下高志 橋本研也 山口正恒

Yamashita Takashi, Ken-ya Hashimoto and Masatsune Yamaguchi

千葉大学 工学部 電気電子工学科

Faculty of Electric and Electronics Engineering, Chiba University

1 はじめに

ストンリー波は重ね合わせた二つの基板の境界にエネルギーを集中させて伝搬する固有モードで[1]、レイリー波と同様にL波(longitudinal wave)とSV波(shear-vertical wave)を主成分としている。これを利用してデバイスを構成した場合、通常の弾性表面波(SAW)と比べてパッケージが簡素化可能という特長を持つ。このことに着目して、ストンリー波に関して様々な検討が行われてきたが[2, 3]、これまでのところ実用的な構造は見いだされていない。

境界波は任意の基板の組合せに対して常に存在するわけではなく、上下の基板が一定の存在条件を満たさなくてはならない。そしてストンリー波の場合、その存在範囲が極めて狭く、これまでの報告例では総て圧電性が弱く、実用性に欠ける。

筆者らは、境界波に伴う圧電反作用により導波される非圧電体/圧電体構造中のSH(shear-horizontal)タイプの圧電横波[4]に着目し、高音速のSiとLiNbO₃の組み合わせにより、leakyタイプだが損失が無視できる程小さく、圧電性が大きいSHタイプの境界波が存在することを示した[5]。

SiとLiNbO₃の張り合わせ技術はElaらによって既に実現されており[6]、この構造を用いることで高性能なデバイスが実現可能と考えられる。またSAWデバイスのSi基板上への集積化や、コンボルバのようにSAWと半導体中のキャリアとの非線形相互作用を利用したデバイスなどへの応用も考えられる。しかし、この構造ではSiの有限な導電性によりIDTの電気的特性が劣化してしまうため、本質的にSiとLiNbO₃の間に絶縁のための誘電層を設けなくてはならない。

本報告では、SiとLiNbO₃の境界にSiO₂の層を挟み

込んだ構造における境界波に対する理論的検討を報告する。低音速のSiO₂を境界に配置することによって、存在条件を満たす範囲が広がり、圧電性も大きくなる。また、SiO₂がSiやLiNbO₃に対して逆の温度特性を持つことから、SiO₂膜厚を適切に選択することによって、零温度特性を有する境界波が実現可能である。

2 Si/LiNbO₃構造における高圧電性境界波

次節以下で述べるSi/SiO₂/LiNbO₃中の境界波との比較のために、Si/LiNbO₃構造における理論解析結果を以下に要約する。この解析結果の大部分は既に文献[5]に示してある。

理論解析した範囲で、特性が最良であった、[001]カットSi<110>伝搬/X-LiNbO₃構造における位相速度V、電気機械結合係数K²をYカットからの回転角θの関数として図1に示す。比較のために、Siが無いLiNbO₃基板単体上のLeaky-SAWの特性を図中に破線を用いて示す。なお、ここに示す解析例では、LiNbO₃表面は電気的に短絡である。境界波においては、Vはθにはあまり依存せず、常に4,450-4,650m/sの範囲にある。一方、K²はLiNbO₃基板単体の場合よりも小さいが、それでも比較的大きく、Siが<110>伝搬、LiNbO₃がY-cut付近のとき、10%を超える大きなK²が得られることがわかる。

図2は伝搬損失を表す。ここで縦軸は波の伝搬に伴う一波長あたりの減衰である。伝搬損失が無視できる程小さくなるカットがいくつか存在することがわかる。

LiNbO₃基板単体上のLeaky-SAWの場合、K²が大きいY-cut付近では伝搬損失が大きいので、そのまま

ではこのカットは使用できず、損失の小さい 41° , 64° が用いられる [7]。また、グレーティング構造により音速を下げて non-leaky とすることにより、大きな K^2 と小さな伝搬損失を合わせ持つ構造を実現しようとする試みも行われている [8]。一方、境界波の場合、Y-cut 付近で K^2 が最大かつ損失がほぼ零という特性が得られる。

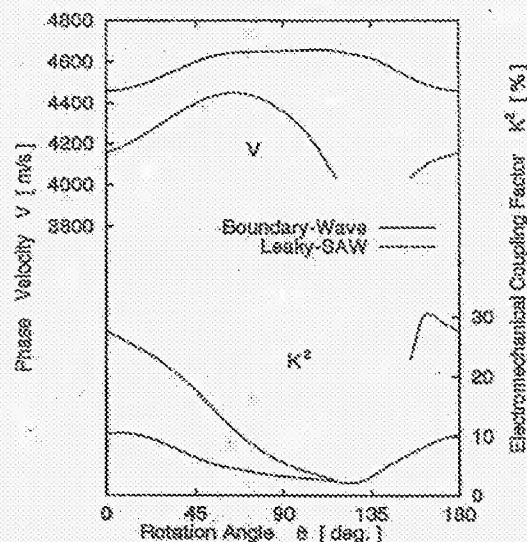


図 1: [001]-Si<110>/X-LiNbO₃構造における境界波の位相速度および電気機械結合係数の θ 依存性

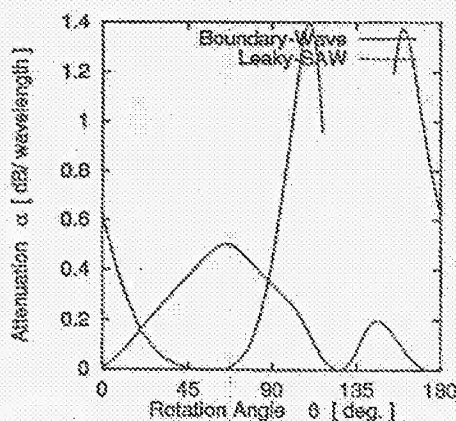


図 2: 伝搬損失の θ 依存性

理論解析の結果、最も良好な特性を示すと考えられる、[001] カット Si<110>伝搬/175°Y-X-LiNbO₃構造における変位分布を図 3 に示す。ここでグラフの横軸は変位の絶対値で、 U_1 は変位の絶対値 $|u_1|$ を $U_{1,0.001}$ により規格化したものである。この図からわかるように、 U_1, U_2 に比べて U_3 が占める割合がかなり大きい。このことから、この波は SH タイプであると考えられる。また、実際にデバイスを作製するにあたって、この構造を用いた場合、Si と LiNbO₃ がいずれも 3~4 波長の厚さが必要であることがわかる。なお、この構造における境界波の位相速度は 4,465 m/s、 K^2 は 10.0%、損失はほぼ零である。

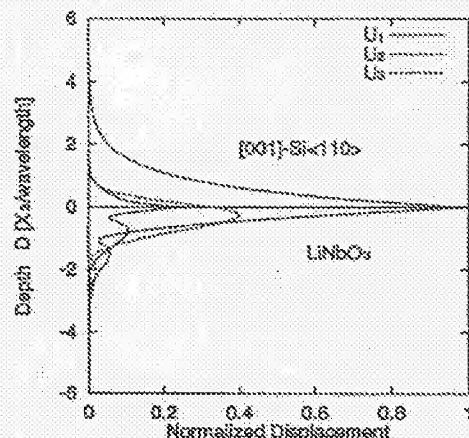


図 3: [001]-Si<110>/175°Y-X-LiNbO₃構造における境界波の変位分布 ($V=4,465$ [m/s], $Loss=0$ [dB/λ], $K^2=10.0$ [%])

3 Si/SiO₂/LiNbO₃構造中を伝搬する境界波

3.1 温度特性の改善

表 1 に今回数値計算に用いた各材料の線膨張係数 α_{11} および位相速度温度係数 TCV を示す。

Si の温度特性は LiNbO₃ と比べると多少良好であるため、Si/LiNbO₃ 構造を伝搬する境界波は、LiNbO₃ 単体上の Leaky-SAW から比べるとやや温度特性が改善される。しかし表 1 に示すように、Si と X-LiNbO₃ はいずれも負の速度温度係数を持っているため、零温度

表 1: 各材料の熱膨張係数 α_{11} および温度温度係数TCV

	α_{11} [ppm/°C]	TCV [ppm/°C]
Si	3.35	-29.0
SiO ₂	0.55	119.5
X-prop LiNbO ₃	15.4	-80 ~ -50

係数を実現することは不可能である。Si 以外の材料を用いることによって、零温度特性実現の可能性はあるが、現段階では Si 以外の単一材料で、このタイプの境界波が存在する構造は見つかっていない[5]。

そこで図 4のように、Si と LiNbO₃ の境界に SiO₂ 層を設けることを検討した。SiO₂ は表 1 に示すように、Si および LiNbO₃ とは逆の符号を持つ。従ってこの構造の SiO₂ 膜厚 λ を適切に選ぶことによって、零温度係数が実現可能であると考えられる。また SiO₂ は音速が低いため、境界波において大きな問題の一つである存在距離も拡大することが予想される。

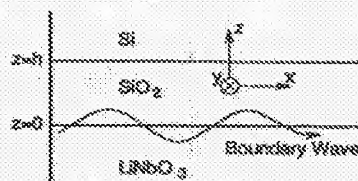


図 4: Si/SiO₂/LiNbO₃ 構造

温度特性を評価する場合、本来は TCD もしくは TCF が一般的であるが、張り合わせ構造では上下の基板の α_{11} の違いが境界波に与える影響について、一言に論ずることは出来ないため、本報告では TCV を用いて温度特性を評価した。

$TCD = \alpha_{11} - TCV$ であることと、表 1 の α_{11} の値から、選択した構造における TCV が 3~15[ppm/°C] 程度の範囲にあるとき、最終的な調整により零 TCD が実現できるものと考えられる。

図 5 に [001]-Si<110>/SiO₂ ($\lambda = 0.5\lambda$)/X-LiNbO₃ 構造を伝搬する境界波の TCV のカット依存性を示す。図中には、比較のために、X-LiNbO₃ 単体上の Leaky-SAW と、図 1,2 でも用いた [001]-Si<110>/X-LiNbO₃ 構造中の境界波における TCV のカット依存性も併せて示す。図の縦軸は TCV[ppm/°C] であり、横軸は LiNbO₃ のカット角 θ を表す。

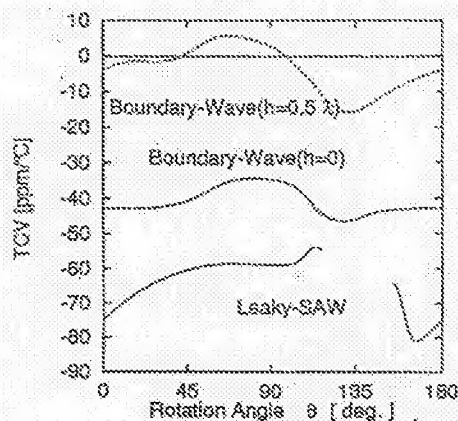


図 5: LiNbO₃ 基板を用いた境界波および Leaky-SAW における温度特性 (TCV) の θ 依存性

前述した様に、Si/LiNbO₃ 構造の境界波は LiNbO₃ 上の Leaky-SAW に比べると、TCV はやや改善されている。その場合でも TCV は -30 ~ -50[ppm/°C] で、熱膨張係数の分だけ TCD は更に悪化してしまう。一方、Si と LiNbO₃ の境界に SiO₂ の層を挟み込んだ構造の場合、適当な回転角 ($\approx 60^\circ$) において零 TCV を実現できることがわかる。解析の結果、膜厚が約 0.4 λ 以上ならば、各膜厚に対して零 TCD を与える最適な回転角が存在することがわかった。

この結果からもわかるように、TCV は λ と密接な関係があるため、零 TCD の観点から有用な λ の範囲は制限される。

3.2 伝搬特性の SiO₂ 膜厚依存性

境界波の伝搬特性として実用上重要な性質を整理すると以下の様になる。

1. 損失が少ない (≈ 0)
2. 電気機械結合係数 K^2 が大きい
3. 零温度特性 (TCV = 3~15[ppm/°C])
4. 位相速度が大きい

ここで検討する系では、(1) Si のカットと伝搬方向、(2) LiNbO₃ のカット及び伝搬方向、並びに (3) SiO₂ の膜厚 λ が伝搬特性を決定するパラメータとなる。

(1) についてはこれまでの解析と同様に、[001] カット<100>伝搬、<110>伝搬、[110]<001>、<110>、

[111] <110>, <112> の計六種類すべてについて調べたが、特に大きな違いは見られなかった。そこで、以下の解析では、これらの中で多少ではあるが最も大きな K^2 が得られる [001] カット <100> 伝搬のみの結果を以下の考察に利用する。

(2) に対しては、 LiNbO_3 の伝搬方向はビームステアリングが生じない主軸 (X) 方向とし、カット方位は圧電性の大きい面 Y カットを対象として調べた。その結果、カット角によって K^2 に大きな差はあるものの、その他の特性は全体的にどのカットでも類似した傾向を持っていることがわかった。そこで、最も K^2 が大きな YX- LiNbO_3 を対象とした解析結果のみを以下に示す。

なお、この境界波にもセザワ波などと同様の複数の高次モードが存在するが、 K^2 が小さく、特筆する点はないので省略する。

図 6 に境界波の位相速度と電気機械結合係数 K^2 の h 依存性を数値解析した結果を示す。解析では、Si と SiO_2 の境界を電気的に開放、 SiO_2 と LiNbO_3 の境界は短絡とした。位相速度が h と共に単調に減少しており、 $h/\lambda > 0.75$ では遅い横波速度 $4,030[\text{m/s}]$ よりも V が小さくなり、境界波は non-leaky となる。

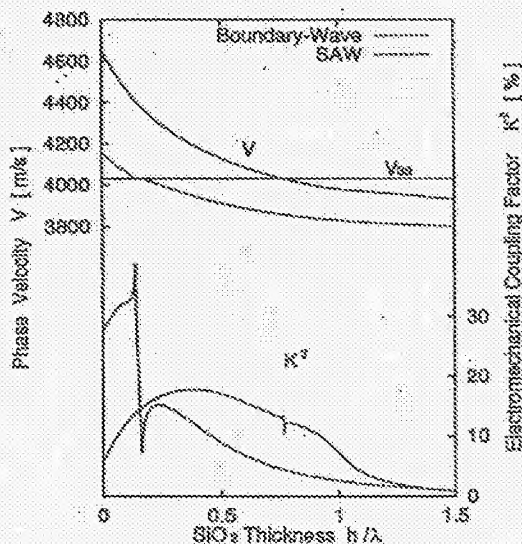


図 6: [001]-Si<100>/ SiO_2 /YX- LiNbO_3 構造における境界波の位相速度と電気機械結合係数の h 依存性

この図から、これまでの Si/ LiNbO_3 構造 ($K_{\text{max}}^2 \approx 11\%$) と比べて非常に大きな K^2 が得られることがわ

かる。また、 h が比較的大きな場合であっても大きな K^2 を有しており、例えば、境界波が non-leaky となる $h/\lambda = 0.8$ 付近でも 12% を越える大きな K^2 を示していることは興味深い。なお、最も K^2 が大きな $h/\lambda = 0.3 \sim 0.5$ の範囲では leaky-nature による損失が大きいことや、零 TCD を実現できないことなどから実用性に欠ける。

比較のために、同図中に Si が無い場合、すなわち LiNbO_3 基板上に SiO_2 膜のみを堆積させた場合の Leaky-SAW の h 依存性を破線で示す。境界波の場合に比べて全体的に速度が遅いが、およそ同様の傾向を有することがわかる。一方 K^2 で比較すると、 h が小さい領域において、Leaky-SAW の方が格段に大きいことがわかる。ただし、この領域では伝搬損失も極めて大きいので、実用的でない。non-leaky の SAW は、Leaky-SAW に比べると格段に K^2 が低くなる。

図 7 に伝搬損失の h 依存性を示す。 $h \approx 0$ と $h/\lambda > 0.75$ では伝搬損失が零となる。前者は図 2 に示したように Si/YX- LiNbO_3 構造ではほぼ零の伝搬損失が得られることに対応したものであり、後者は前述のように速度の減少により、 $h/\lambda > 0.75$ で境界波が leaky タイプから non-leaky タイプとなるためである。

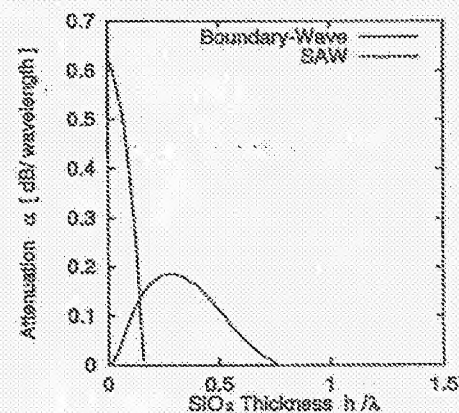


図 7: 伝搬損失の h 依存性

図 8 に TCV を示す。 h/λ が $0.6 \sim 0.8$ のとき、TCV は $3 \sim 15[\text{ppm}/^\circ\text{C}]$ となる。従って構造の線膨張係数に合わせて h をこの範囲で選択することにより零 TCD が実現可能と考えられる。

境界波は SAW と比較して全体的に分散性が少ないため、 h のずれに対して特性が影響を受けにくいこと

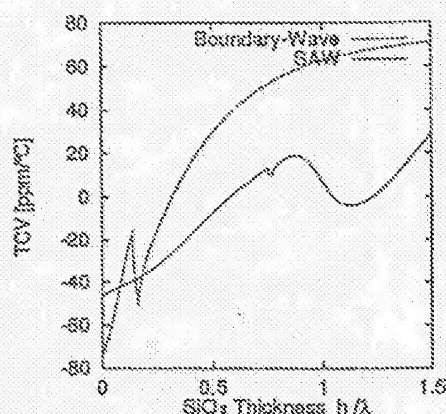


図 8: TCF の h 依存性

がわかる。これはデバイスの作製歩留まりの観点から有利であると思われる。

以上の考察から、 $[001]\text{-Si}\langle 100 \rangle/\text{SiO}_2/\text{YX-LiNbO}_3$ 構造で $h/\lambda \approx 0.8$ の時の境界波が最も良い特性である事が結論付けられる。その構造においては、位相速度が $4,021 \text{ [m/s]}$ 、伝搬損失が零、温度特性が $15 \text{ [ppm/}^\circ\text{C]}$ 、 K^2 が 12% となる。

なお、 SiO_2 と Si の境界を短絡した場合についても同様の解析を行なったが、位相速度、伝搬損失、温度特性についてはまったく変化は見られなかった。また、 K^2 については、 SiO_2 層が非常に薄いとき、開放時と比べて K^2 がやや大きくなる ($\sim 0.5\%$) 傾向が見られた。しかしその影響は指数関数的に減少し、 $h/\lambda = 0.5$ のとき $5 \times 10^{-3}\%$ 、 $h/\lambda = 1$ のとき $4 \times 10^{-8}\%$ 程度の変化であった。これは、 h をある程度大きくすると、 Si 層の電気的性質が境界波の伝搬に対してほとんど電気的な影響を与えないことを意味する。

3.3 変位分布

図 9 に $[001]\text{-Si}\langle 100 \rangle/\text{SiO}_2/\text{YX-LiNbO}_3$ 構造において $h/\lambda = 0.8$ のときの変位分布を示す。図 3 に示した $[001]\text{-Si}\langle 110 \rangle/175^\circ\text{YX-LiNbO}_3$ 構造の場合と異なり、 U_x 成分が主成分となっている。このときの電気機械結合係数は 12% と非常に大きく、このことに対応して図 8 と比べてもかなり境界付近に変位が集中している。また、 SiO_2 中にもかなりの変位が集中しており、速度の遅い SiO_2 が導波路的な役割を果たしていることがわかる。

また、この結果から、この構造を用いて実際にデバイスを作製する場合、上下の基板の厚さがそれぞれ 2 波長程度あれば十分であることがわかる。

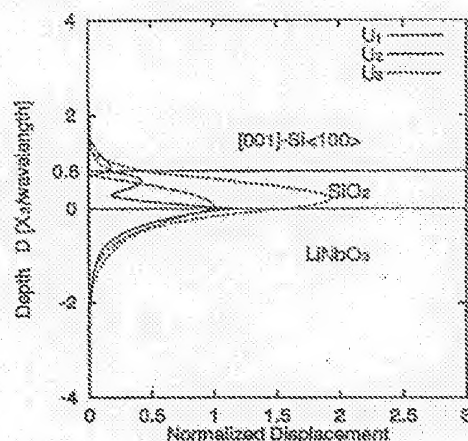


図 9: $[001]\text{-Si}\langle 100 \rangle/\text{SiO}_2 (h/\lambda = 0.8)/\text{YX-LiNbO}_3$ 構造の変位分布 ($V=4,021 \text{ [m/s]}$, $\text{Loss}=0 \text{ [dB/}^\circ\text{C]}$, $K^2=12.0 \text{ [\%]}$, $\text{TCF}=15 \text{ [ppm/}^\circ\text{C]}$)

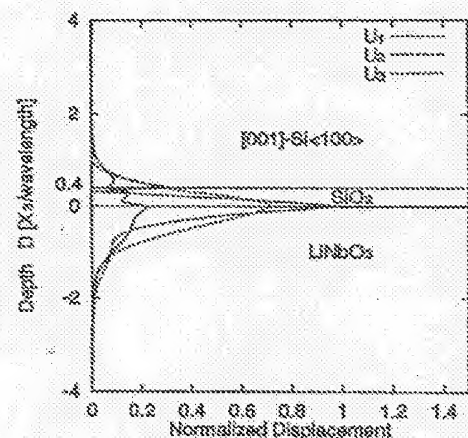


図 10: $[001]\text{-Si}\langle 100 \rangle/\text{SiO}_2 (h/\lambda = 0.4)/\text{YX-LiNbO}_3$ 構造の変位分布 ($V=4,183 \text{ [m/s]}$, $\text{Loss}=0.16 \text{ [dB/}^\circ\text{C]}$, $K^2=17.8 \text{ [\%]}$, $\text{TCF}=-19 \text{ [ppm/}^\circ\text{C]}$)

比較のために、図 10 に $h/\lambda = 0.4$ のときの変位分布を示す。この構造においては、 K^2 は大きい方が、leaky-type であり、その伝搬損失が大きい。 K^2 が大きいこと

に対応して、より境界付近に変位が集中している事がわかる。この構造では U_2 、 U_3 成分ともかなり大きい。

なお、さらに h/λ を増して行くと K^2 が小さくなるため、境界付近への変位の集中が弱くなる。しかし SiO_2 が導波路的な役割を果たすため、 Si/LiNbO_3 構造に比べると変位が境界に集中する。

4 まとめ

本報告では、 Si と LiNbO_3 の境界に SiO_2 の膜を挟み込んだ構造で、同様の境界波について理論的検討を行なった結果について報告した。 SiO_2 が境界あることによって、境界波の存在範囲が広がり、また SiO_2 が LiNbO_3 に対して負の温度特性を持つことから、 SiO_2 の膜厚を適切に選択することによって、零温度特性を有する境界波が実現可能である。さらにその他の伝搬特性についてもより優れた構造が期待できる。

理論解析の結果、non-leaky タイプの境界波で伝搬損失が零であるにも関わらず、12%の K^2 を持つ構造が存在することがわかった。その構造は位相速度が4,031[m/s]と高速である。また、TCVが15[ppm/°C]であり、構造の線膨張係数に合わせてさらに SiO_2 膜厚を微調整すれば零TCDを実現できると思われる。

今後はまず、これまでの結果を実験に確認するために実験を行なう予定である。

謝辞 本研究に有益な御意見を戴いた(株) 東芝の三島直之様に感謝致します。

参考文献

- [1] R.Stoneley: 'Elastic Waves at the Surface of Separation of Two Solids', Roy. Soc. Proc. London, Series A, 106 (1924) pp.416-429
- [2] J.G.Scholtz: 'The Range of Existence of Rayleigh and Stoneley Waves', Roy. Astron. Soc. London, Monthly Notices Geophys, Suppl. 5 (1947) pp.120-126
- [3] Y.Shimizu and T.Irino: 'Stoneley Waves Propagating along an Interface between Piezoelectric Material and Isotropic Material', Proc. IEEE Ultrasonic Symposium (1983) pp.373-376
- [4] G.Maerfeld and P.Tournols: 'Pure Shear Elastic Surface Wave Guided by the Interface of Two Semi-Infinite Media', Appl. Phys. Letters 19, pp.117-118
- [5] T. Yamashita, K. Hashimoto, and M. Yamaguchi: 'Highly Piezoelectric SH-type Boundary Waves', Jpn. J. Appl. Phys., 36,5B (1997) to be published.
- [6] K.EDA, Y.Tomita and M.Sugimoto: 'Novel Composite Piezoelectric Materials Using Direct Bonding Techniques', Proc. IEEE Ultrasonic Symposium (1995) pp.921-924
- [7] 清水: '弾性表面波材料の伝搬特性の利用と現状' 電子情報通信学会論文誌 A Vol.J 76-A No.2 (1993) pp.129-137
- [8] 磯部, 足田, 佐岡, 田藤, 横井: 'Al/LiNbO₃におけるグレーティングモード広帯域SAW共振器' 電子情報通信学会総会大会予稿集 (1997) A-11-15